

УДК 004.94: 669.162.275.2

О МОДЕЛИРОВАНИИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Валеева Я.Е.

*ФГБОУ ВПО «Магнитогорский государственный технический университет
им. Г.И. Носова», г. Магнитогорск, Россия*

Научный руководитель – Кочержинская Ю.В., к.т.н.

В условиях рыночной экономики одной из ключевых целей для металлургического предприятия является получение продукции наилучшего качества с наименьшими затратами. Для ее достижения необходимо определить оптимальный химический состав сырья. Однако во многих случаях экспериментальное решение задачи определения оптимального состава является либо чересчур затратным, либо невозможным при нынешнем уровне развития науки и технологии. Одним из таких случаев является, например, определение химического состава металлургического расплава. Важнейшие свойства металлургических расплавов, такие как прочность и ковкость, зависят от состава примесей. Изучение влияния конкретных видов примесей при заданных условиях позволит получать более качественный металл при наименьших издержках производства. Эмпирические способы исследования состава и свойств расплава не позволяют получить полностью достоверные сведения о расплаве, находящемся под воздействием высоких температур, кроме того, являются довольно дорогостоящими.

В то же время текущий уровень развития информационных технологий, в том числе и персональных компьютеров, позволяет производить моделирование разнообразных физических и химических процессов с достаточно хорошей точностью, причем при сравнительно небольших затратах. В связи с этим компьютерное моделирование реальных металлургических расплавов оказывается весьма актуальным. Такое исследование позволит понять и оценить на ионном уровне механизм и кинетику взаимодействия компонентов расплава, что в свою очередь сделает возможным проведение оперативного прогноза свойств расплава, что необходимо для своевременной корректировки его состава.

Объектами исследования при компьютерном имитационном моделировании металлургических расплавов являются неметаллические и металлические расплавы. К неметаллическим относятся шлаки, основу которых составляют соединения кремния, алюминия, марганца и кальция. К металлическим расплавам относятся чугун и сталь, основу которых составляют соединения железа. Между этими соединениями действуют силы ионной, ковалентной, металлической химической связи, а также ван-дер-ваальсовы силы межмолекулярного притяжения.

Для моделирования процессов в металлургических расплавах применяют близкие, но различные методы. Двумя основными методами компьютерного моделирования являются метод молекулярной динамики (МД) и метод Монте-Карло (МК).

Метод молекулярной динамики является теоретическим детерминистическим методом, что означает исключение стохастических взаимодействий. Отправной точкой метода является хорошо определенное микроскопическое описание системы. Причем приготовление «хороших» начальных данных (координат и скоростей) для сложных молекулярных структур является проблемой не менее важной и, как правило, более трудоемкой, чем получение продуктивных траекторий, на которых осуществляется анализ поведения

моделируемой системы. Сущность метода молекулярной динамики состоит в численном решении уравнений классической механики для получения траекторий движения некоторого ограниченного числа частиц, по которым могут быть определены дальнейшие характеристики расплавов, как статические, так и динамические, как равновесные, так и неравновесные.

Весь процесс моделирования методом МД можно разделить на 3 этапа:

- Инициализация;
- Достижение равновесия;
- Расчет характеристик.

1 Инициализация

В качестве входных данных для моделирования выступают состав расплава, его температура и плотность. На основе этих данных проводят инициализацию системы взаимодействующих частиц (определяют начальные положения частиц и их скорости).

2 Достижение равновесия

Основой метода молекулярной динамики является численное интегрирование уравнений движения системы, представляющих собой законы классической механики Ньютона:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i(t), \quad m_i \cdot \frac{d\vec{v}_i(t)}{dt} = \vec{F}_i,$$

где \vec{r}_i , \vec{v}_i , m_i – радиус-вектор, скорость и масса i -частицы соответственно, \vec{F}_i – равнодействующая сил, действующих на частицу со стороны всех остальных.

При интегрировании уравнений движения система релаксирует в равновесное состояние.

Для исключения влияния граничных эффектов используются периодические граничные условия Борна-Кармана, при которых система является псевдобесконечной за счет окружения расчетного куба бесконечным числом копий. Тогда имитируется взаимодействие каждой конкретной частицы со всеми остальными частицами бесконечной периодической системы.

На каждом шаге по времени вычисляются силы, действующие на частицу. Для описания сил межчастичного взаимодействия выбирают аппроксимирующий потенциал взаимодействия из соображений соответствия теоретических данных экспериментальным. Суммируются все силы, действующие на заданную частицу.

Также на каждом временном шаге происходит пересчет ускорений частиц по формулам, определяемым вторым законом Ньютона:

$$a_x = \frac{F_x}{m}, a_y = \frac{F_y}{m}, a_z = \frac{F_z}{m}.$$

На основе полученных ускорений производится пересчет координат частиц.

Пересчет сил, ускорений и расчет траекторий частиц продолжается до тех пор, пока система не достигнет равновесия. Система достигает равновесного состояния, когда равнодействующие сил, действующих на каждую частицу, так же как и ускорения частиц, становятся равными нулю.

3 Расчет характеристик

После достижения равновесного состояния производится расчет парных парциальных корреляционных функций (ППКФ). ППКФ $\rho(r_{ij})$ – функция, определяющая плотность вероятности расположения атомов j на расстоянии r от атомов i (т. е. характеризующая распределение атомов j -го сорта относительно атомов i -го сорта). То есть, для построения

данной зависимости определяется количество пар частиц заданных сортов i и j , встречающихся на каждом конкретном расстоянии друг от друга. Дальнейший анализ ППКФ позволит определять различные характеристики расплавов.

Моделированием бинарных, тернарных и многокомпонентных расплавов методом молекулярной динамики занимаются: Д.К. Белащенко [2, 3], А.А. Мирзоев, И.В. Мальцев, Б.Р. Гельчинский, Л.В. Скворцов, О.И. Бухтояров.

Метод Монте-Карло является основным стохастическим методом моделирования молекулярных систем на ЭВМ. Этот метод основывается на статистической оценке сгенерированной с помощью последовательности случайных чисел выборки.

Алгоритм моделирования методом Монте-Карло можно описать следующим образом:

1. Задается начальная точка x_0 в фазовом пространстве. Данный шаг аналогичен инициализации в методе МД.
2. Случайным образом выбирается новое состояние или конфигурация системы. Например, частица случайным образом перемещается с позиции x_0 на новую позицию x' внутри модельного куба.
3. Вычисляется вероятность перехода $W(x_0, x')$.
4. Генерируется равномерно распределенное случайное число от 0 до 1.
5. Если вероятность оказывается меньше сгенерированного в четвертом пункте числа, то за новое состояние принимают x_0 , иначе – x' .
6. Осуществляется переход к пункту 2.

Работы по моделированию систем методом Монте-Карло имеются у Д.К. Белащенко [2], О.И. Островского.

Основным преимуществом методов МК и МД является то, что по полученным траекториям частиц можно определить практически любые характеристики – как термодинамические (энергия, давление, энтропия), так и кинетические (коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов). Особенностью метода молекулярной динамики является то, что он позволяет получать динамические характеристики системы, тогда как метод Монте-Карло позволяет рассчитывать только равновесные характеристики системы. Точность вычислений при этом ограничивается, в основном, вычислительной мощностью ЭВМ, что является и преимуществом, и недостатком, в связи с тем, что текущий уровень развития вычислительной техники все еще не позволяет производить сверхточные расчеты, однако в ближайшее время это положение может исправиться.

Недостатком методов является сложность определения межчастичных потенциалов, проблема нахождения которых остается актуальной и по сей день. Функции, аппроксимирующие потенциалы межчастичного взаимодействия, являются полуэмпирическими, соответственно даже при применении теоретических методов компьютерного моделирования остается значительная зависимость от экспериментальных данных, что, очевидно, ограничивает точность расчетов.

Таким образом, область моделирования многокомпонентных металлургических расплавов представляется актуальной, в частности для производства чугуна, существенной альтернативы которому на сегодняшний день не существует.

Список цитированных источников

1. Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
2. Белащенко, Д.К. Компьютерное моделирование структуры и свойств некристаллических оксидов // Успехи химии. – 1997.
3. Белащенко, Д.К. Компьютерное моделирование некристаллических веществ методом молекулярной динамики/ Соросовский образовательный журнал. – 2001.